

ЗАСТОСУВАННЯ МОДЕЛІ ДЕРЕВОПОДІБНОЇ ПОРИСТОЇ СТРУКТУРИ ДЛЯ АНАЛІЗУ ВЗАЄМОДІЇ O₂ ТА CO₂ З ТВЕРДИМ ВУГЛЕЦЕВИМ ЗАЛИШКОМ**© В.О., Квіцинський, С.І. Кривошеєв, к.т.н., С.В. Марущак (ІВЕ НАН України)**

Модель деревоподібної пористої структури застосована для аналізу взаємодії кисню і діоксиду вуглецю з вуглецевим залишком, що утворюється внаслідок випаровування та термічного розкладу вуглець-місткої речовини. При цьому виходили з наступних положень: середня довжина пор (визначеного радіусу) пропорційна радіусу; площі, котру займають вхідні отвори на поверхні вуглецевого залишку, дорівнює об'ємній частці відповідних пор. При обчисленні швидкості реакції молекул O₂ і CO₂ в мікро-, мезо- і макропорах враховувались кнудсенівська дифузія в порах, фізична адсорбція на поверхні пор та відповідна константа швидкості гетерогенної реакції з вуглецевим залишком.

Отримано ефективні константи швидкості реакції кисню і діоксиду вуглецю на вході в отвори пор у вигляді добутку константи швидкості реакції і множника, котрий залежить від безрозмірних параметрів процесу: співвідношень «довжина / радіус пори», «теплова швидкість молекул / константа швидкості реакції», об'ємних часток мікро-, мезо-, макропор вуглецевого залишку та ін. Враховано обмеження швидкості реакції в порі хаотичним потоком молекул у вхідний отвір, проведено аналіз меж застосування моделі для реакцій кисню і діоксиду вуглецю з вуглецевим залишком.

Для поверхні вуглецевого залишку отримано зв'язок ефективної константи швидкості гетерогенної реакції сполуки з параметрами багаторівневої пористої структури та константою швидкості реакції для щільної поверхні пор вуглецевого залишку. Отримано аналітичні вирази, що пов'язують глибину проникнення реагенту в пори і ефективну внутрішню поверхню вуглецевого залишку з параметрами деревоподібної пористої структури та константою швидкості гетерогенної реакції. Продемонстровано вплив пористої структури на характер залежності ефективної константи швидкості реакції O₂ в порах вуглецевого залишку від концентрації нелокалізованої мінеральної приміси.

Ключові слова: модель деревоподібної пористої структури; вуглецевий залишок; концентрація мінеральної домішки; внутрішня поверхня, швидкість реагування O₂ та CO₂.